

二维铁电 $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$ 垂直异质结能带的应力调控

李永宁 谢逸群 王音

Strain control of two-dimensional ferroelectric  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  vertical heterojunction energy band

Li Yong-Ning Xie Yi-Qun Wang Yin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 227701 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20211158

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211158>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

非金属元素掺杂二硒化钨/石墨烯异质结对其肖特基调控的理论研究

Theoretical study on Schottky regulation of  $\text{WSe}_2/\text{graphene}$  heterostructure doped with nonmetallic elements

物理学报. 2020, 69(11): 117101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200080>

原子吸附的二维 $\text{CrI}_3$ 铁磁半导体电学和磁学性质的第一性原理研究

First principles study of electrical and magnetic properties of two-dimensional ferromagnetic semiconductors  $\text{CrI}_3$  adsorbed by atoms

物理学报. 2021, 70(11): 117101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210090>

应力调控下二维硒化锗五种同分异构体的第一性原理研究

First-principles study of five isomers of two-dimensional  $\text{GeSe}$  under in-plane strain

物理学报. 2019, 68(11): 113103 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182266>

二硫化钼/石墨烯异质结的界面结合作用及其对带边电位影响的理论研究

Interfacial cohesive interaction and band modulation of two-dimensional  $\text{MoS}_2/\text{graphene}$  heterostructure

物理学报. 2017, 66(8): 087101 <https://doi.org/10.7498/aps.66.087101>

二维 $\text{Nb}_2\text{SiTe}_4$ 基化合物稳定性、电子结构和光学性质的第一性原理研究

First-principles study of stability, electronic and optical properties of two-dimensional  $\text{Nb}_2\text{SiTe}_4$ -based materials

物理学报. 2020, 69(19): 197102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200848>

一维carbyne链原子键性质应变调控的第一性原理研究

First-principles study of atomic bond nature of one-dimensional carbyne chain under different strains

物理学报. 2020, 69(24): 246802 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201231>

# 二维铁电 $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$ 垂直异质结能带的应力调控\*

李永宁<sup>1)</sup> 谢逸群<sup>2)</sup> 王音<sup>1)†</sup>

1) (上海大学物理系, 上海 200444)

2) (上海师范大学物理系, 上海 200030)

(2021年6月21日收到; 2021年7月22日收到修改稿)

近年来, 二维铁电异质结在高密度存储及光电器件等领域展现了应用潜能, 开发新颖二维铁电异质结是当前的重要研究方向. 本论文采用第一性原理计算研究二维铁电材料  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  与二维单层  $\text{InSe}$  组成的  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  垂直异质结的能带结构及应力调控. 计算表明,  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  异质结为间接带隙半导体, 具有 II 型能带匹配. 当  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的极化方向垂直表面朝外时, 带隙大小为 0.50 eV, 价带顶和导带底分别来自于  $\text{InSe}$  和  $\text{In}_2\text{Se}_3$ ; 当  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的极化方向指向面内时, 带隙降低 0.04 eV, 价带顶和导带底的来源互换. 在面内拉伸下, 拉伸度越大, 带隙越小. 当极化方向指向面外(内)时, 在双轴拉伸应变达到 6%(8%) 及以上时会使异质结由半导体转变为导体; 在双轴压缩应变为 -6%(-8%) 下还可使异质结由间接带隙变为直接带隙; 对于单轴拉伸及压缩, 定性结果与双轴应变一致. 本论文的研究结果表明改变极化方向和施加应力是调控二维  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  铁电异质结的有效方式, 可为设计相关铁电器件提供理论参考.

**关键词:** 二维铁电异质结, 能带调控, 机械应变, 第一性原理**PACS:** 77.80.-e, 73.40.Lq, 21.60.De, 71.20.-b**DOI:** 10.7498/aps.70.20211158

## 1 引言

自石墨烯被成功制备以来<sup>[1]</sup>, 各种二维材料层出不穷. 在近些年电子器件小型化的趋势下, 二维材料依靠其独特的电学、磁学性质成为新型功能材料领域的研究热点. 除石墨烯外, 目前已成功制备出磷烯<sup>[2]</sup>、硅烯<sup>[3]</sup>、过渡金属氧化物 (TMDCs)<sup>[4]</sup> 等二维材料. 二维材料可组合成垂直范德瓦尔斯异质结, 如石墨烯/h-BN<sup>[5]</sup>、石墨烯/MoS<sub>2</sub><sup>[6]</sup>、MoS<sub>2</sub>/WS<sub>2</sub><sup>[7]</sup>、MoS<sub>2</sub>/WSe<sub>2</sub><sup>[8]</sup> 等异质结.

二维铁电异质结因其独特的物性吸引了关注. 如在  $\text{MoTe}_2/\text{CuInP}_2\text{S}_6$  异质结中,  $\text{CuInP}_2\text{S}_6$  的极化反转会改变异质结的开态及关态电压<sup>[9]</sup>. 最近, 由二维铁电材料  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  (简称  $\text{In}_2\text{Se}_3$ ) 组成的异

质结也吸引了大量研究. Ayadi 等<sup>[10]</sup> 的研究表明在  $\text{In}_2\text{Se}_3$ /石墨烯异质结中  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的极化反转会引起肖特基势垒的改变. Li 等<sup>[11]</sup> 制备了基于  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{MoS}_2$  异质结制成的场效应管, 结果表明  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{MoS}_2$  异质结场效应管可使用垂直方向电场控制开关, 开关比高达 200%. 这些研究表明  $\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结在多个领域的应用潜能, 因此开发新型二维  $\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结值得进一步研究.

目前,  $\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结已成为学界的研究热点, 但当前的研究主要集中于分析其光学性质<sup>[12]</sup>、电学性质<sup>[13]</sup> 及极化反转对其物理性质的影响<sup>[14]</sup>, 对能带调控方面的研究还不多. 在诸多调控手段中, 应力是目前实验较为容易施加的一种调控手段<sup>[15-17]</sup>, 而且许多计算研究也表明应力是一种调控材料能带性质的有效手段<sup>[18,19]</sup>. 本工作使用与单

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11774217, 11804216, 51871156) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yinwang@shu.edu.cn

层  $\text{In}_2\text{Se}_3$  晶格常数接近的单层  $\text{InSe}$  组成二维垂直范德瓦尔斯异质结, 使用第一性原理计算, 计算该异质结的能带结构及应力调控. 结果表明, 改变单层  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的极化方向可调控异质结带隙大小及能带匹配性质, 此外施加合适的面内力学应变可有效调控异质结的带隙类型, 并产生半导体到金属的转变.

## 2 计算参数

本工作中所有计算均使用第一性原理软件包 Vienna *ab initio* simulation package (VASP). 在计算中选取 Perdew-Burke-Ernzerhofer(PBE) 交换 k 关联泛函, 平面波函数截断能为 500 eV, 能量收敛标准为  $10^{-5}$  eV; 使用 Grimme 等 [20] 提出的 DFT-D3方法描述垂直异质结层间的范德瓦尔斯相互作用; 原胞自洽计算采用  $15 \times 15 \times 1$  的 Monkhorst-pack  $k$  点网格. 异质结置于  $x$ - $y$  平面, 在  $z$  方向上设置 30 Å (1 Å = 0.1 nm) 的真空层用以消除原胞周期映像之间的相互作用.

本文讨论了异质结的多种可能结构, 根据结合能来选取能量最低构型. 结合能  $E_f$  定义为

$$E_f = E_{\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}} - E_{\text{InSe}} - E_{\text{In}_2\text{Se}_3}, \quad (1)$$

其中  $E_{\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}}$ ,  $E_{\text{InSe}}$ ,  $E_{\text{In}_2\text{Se}_3}$  分别为  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  异质结、单层  $\text{InSe}$  和单层  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的总能量.

平面平均微分电荷密度  $\Delta\rho(z)$  为描述异质结层间电荷转移的物理量, 在本工作中计算方法为

$$\begin{aligned} \Delta\rho(z) = & \int \rho_{\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}}(x, y, z) dx dy \\ & - \int \rho_{\text{InSe}}(x, y, z) dx dy \\ & - \int \rho_{\text{In}_2\text{Se}_3}(x, y, z) dx dy, \quad (2) \end{aligned}$$

其中,  $\rho_{\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}}(x, y, z)$ ,  $\rho_{\text{InSe}}(x, y, z)$ ,  $\rho_{\text{In}_2\text{Se}_3}(x, y, z)$  分别为  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  异质结、单层  $\text{InSe}$  和单层  $\text{In}_2\text{Se}_3$  空间中  $(x, y, z)$  点处电荷密度.

## 3 结果与讨论

### 3.1 二维铁电 $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$ 垂直异质结的能带结构

单层  $\text{In}_2\text{Se}_3$  与单层  $\text{InSe}$  均为六角晶胞, 其中  $\text{InSe}$  的晶格常数  $a = b = 4.094$  Å, 单层  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的晶格常数为  $a = b = 4.106$  Å, 均与相关文献的计

算结果吻合 [21,22]. 二者的晶格失配比为 0.2%, 晶格高度匹配. 将单层  $\text{In}_2\text{Se}_3$  置于单层  $\text{InSe}$  上方以构建  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  垂直异质结. 根据两层之间  $\text{In}$  原子的相对位置关系, 构建了 AA, AB, AC 三种结构, 如图 1(a) 所示. 图 1(b) 为 3 种结构的结合能与层间距的关系, 可看出 AA 结构的结合能明显小于 AB 结构的结合能. 因此在本文中只研究 AA- $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  异质结的能带性质及调控方式. 根据  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的极化特点 [23], 构建了极化方向相反的两种 AA 构型,

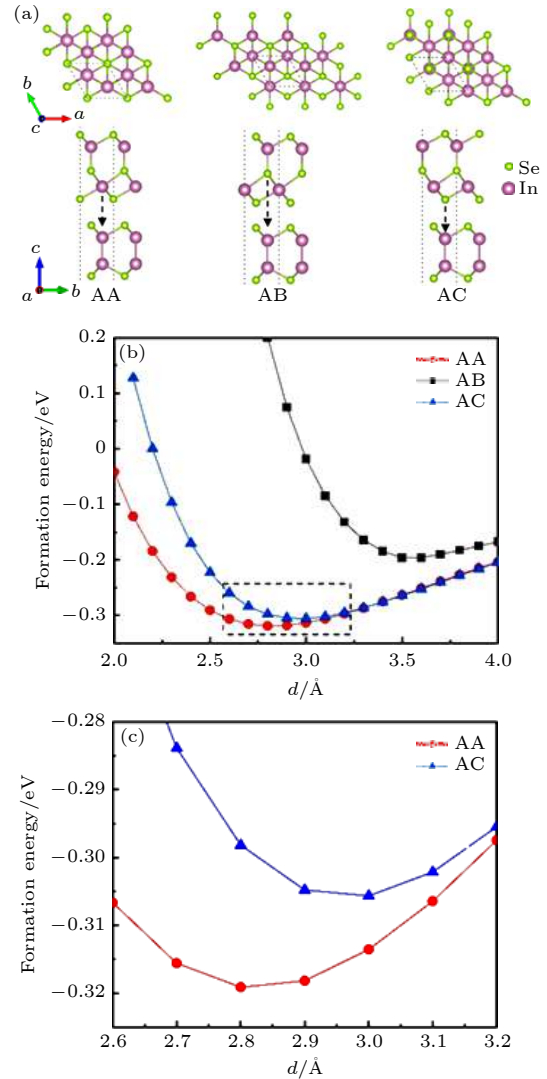


图 1 (a)  $\text{InSe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  异质结的 3 种堆叠方式, 黑色虚线箭头标注了异质结不同层的  $\text{In}$  原子的位置关系; (b) 3 种结构在不同层间距下的能量; (c) 图 1(b) 中黑色虚框部分的局部放大图

Fig. 1. (a) Three stacking methods of  $\text{InSe}/\text{In}_2\text{Se}_3$  heterojunctions, where black dashed arrows mark the positional relationship of  $\text{In}$  atoms in different layers of the heterojunction; (b) formation energy of the three structures at different layer spacings; (c) a partial enlarged view of the black dashed part in Fig.1 b).

当  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的极化方向垂直异质结所在平面 ( $x-y$  面) 且指向面外时 ( $+z$ ), 称为  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I), 当极化方向垂直指向面内 ( $-z$ ) 时, 称之为  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II), 两种结构如图 2(a) 所示. 它们的结合能对比如图 2(b) 所示, 可看出  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 的结合能比

$\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 的结合能小 0.019 eV, 表明  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 较  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 更为稳定. 这是因为在  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 中  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的自发极化方向与整体的电荷转移方向相同, 使得异质结中产生了更强的范德瓦尔斯相互作用 [24].

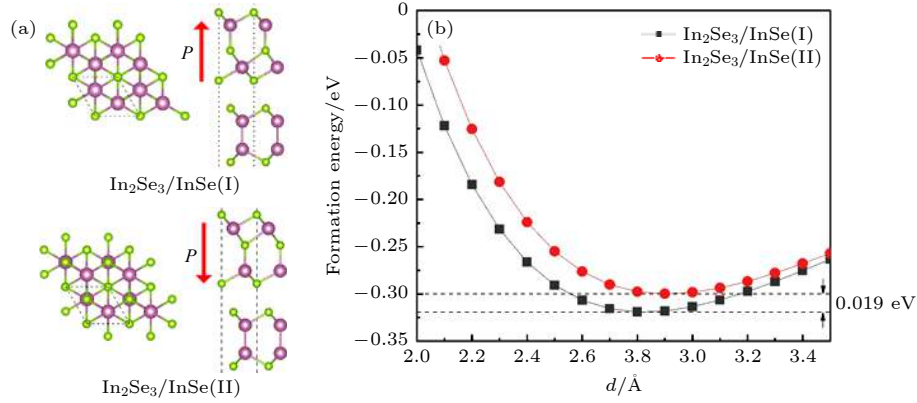


图 2 (a)  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 和  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 的晶格结构, 黑色虚框表示晶格, 红色箭头表示异质结中  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的自发极化方向; (b)  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 和  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 的结合能对比

Fig. 2. (a) Lattice structure of  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) and  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II), where the black dashed frame represents the crystal lattice, and the red arrow represents the spontaneous polarization direction of  $\text{In}_2\text{Se}_3$ ; (b) binding energy comparison of  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) and  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II).

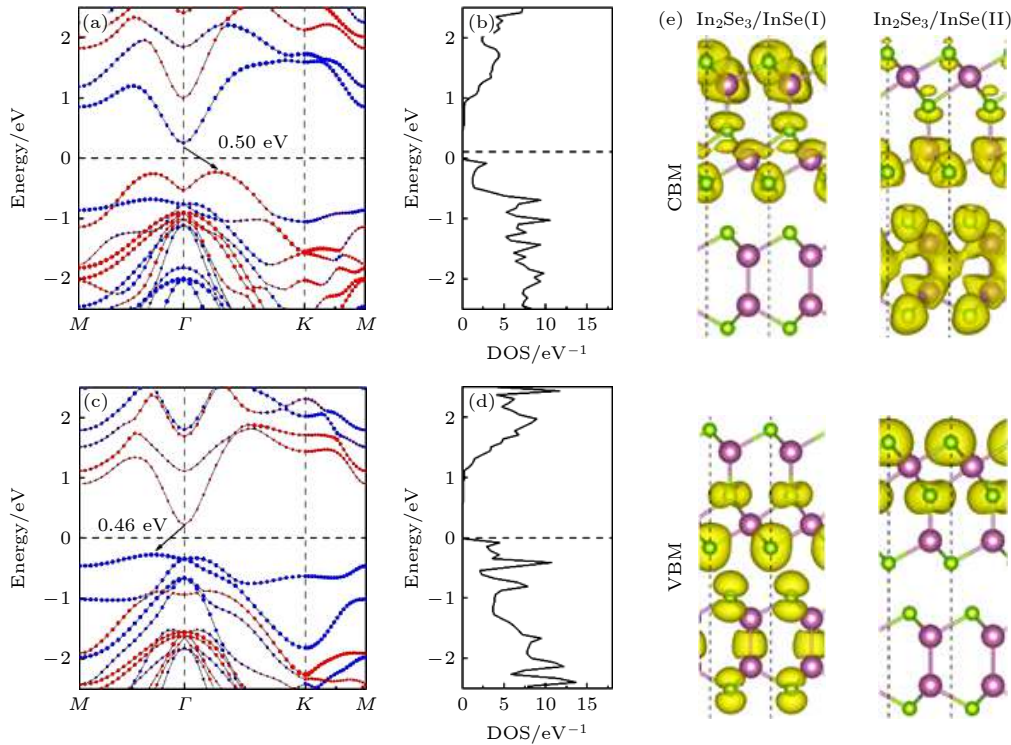


图 3 (a)  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 的能带结构及 (b) 态密度; (c)  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 的能带结构及 (d) 态密度. 能带图中红色和蓝色表示  $\text{InSe}$  及  $\text{In}_2\text{Se}_3$  对能带的贡献, 黑色箭头表示带隙, 由 CBM 指向 VBM; (e)  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 和  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) CBM 和 VBM 所在能带的电荷空间分布

Fig. 3. (a) Band structure of  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) and (b) density of states; (c) band structure of  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) and (d) density of states, where the red and blue in the energy band diagram indicate the contribution of  $\text{InSe}$  and  $\text{In}_2\text{Se}_3$  to the energy band, and the black arrow indicates the band gap, pointing from CBM to VBM; (e) decomposed charge densities of CBM and VBM for  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) and  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II).

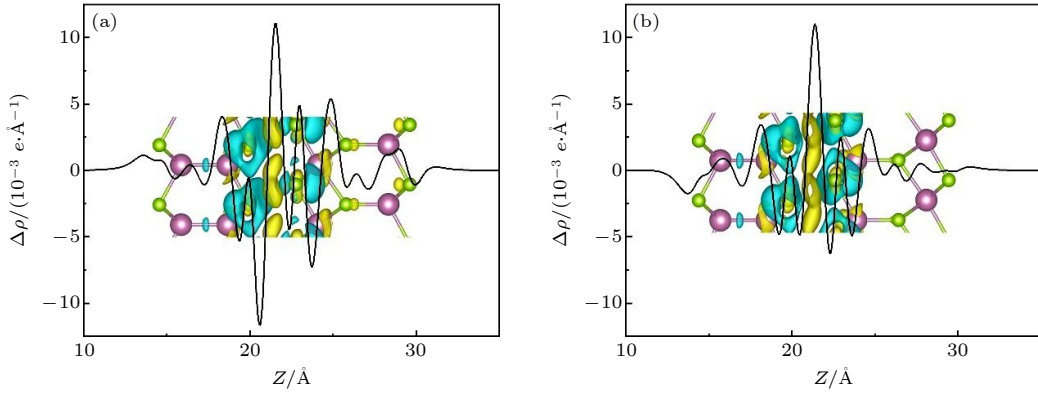


图 4 (a)  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 和 (b)  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 沿  $Z$  方向的平面平均差分电荷密度. 图中黄色和青色包围面分别表示电子的聚集和耗尽区

Fig. 4. (a) Plane-averaged charge density difference for  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) and (b)  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) at equilibrium distance along the  $Z$  direction, where the yellow and cyan envelope areas represent electron accumulation and depletion, respectively.

图 3 给出了  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 和  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 的投影能带结构, 其中红色表示 InSe 对能带的贡献, 蓝色部分表示  $\text{In}_2\text{Se}_3$  对能带的贡献. 可看出,  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 是间接带隙半导体, 带隙为 0.50 eV;  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 也是间接带隙半导体, 带隙为 0.46 eV.  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 的带隙较  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 增大了 0.04 eV, 可见极化反转减小了带隙. 在  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 中, 价带顶 (valence band maximum, VBM) 主要来自 InSe 的贡献, 而导带底 (conduction band minimum, CBM) 几乎全部来自于  $\text{In}_2\text{Se}_3$ . 与之相反, 在  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 中, VBM 几乎全部分布于  $\text{In}_2\text{Se}_3$ , CBM 主要分布于 InSe. 图 3(c) 给出了两种异质结 VBM 及 CBM 的电荷空间分布, 可以明显看到上述特点. 这表明  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  异质结具有 II 型能带匹配, 且极化反转会使 CBM 和 VBM 的空间分布对调.

计算  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 和  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 的差分电荷密度, 分别如图 4(a) 和 4(b) 所示, 其中黄色和青色区域分别表示电荷的聚集区和耗尽区. 从图 4 可看出, 界面上的电荷分布主要存在于层间相邻的 Se 原子之间, 电子主要在  $\text{In}_2\text{Se}_3$  一侧聚集, 在 InSe 一侧耗尽. 使用 Hirshfeld-I 方法<sup>[25]</sup> 求出  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 和  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 的层间电荷转移分别为 0.033 e 和 0.031 e. 这一计算结果表明  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 较  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 发生了更多的层间电荷转移, 说明  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 的层间相互作用要强于  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II), 这也是  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 的结合能比  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 更低的原因.

### 3.2 $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$ 异质结能带结构的应力调控

分别研究了水平单轴和双轴应变对  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  异质结能带结构的影响. 应变的施加方式如图 5 所示, 其中双轴应变沿原胞的两个基矢方向施加; 施加单轴应变时, 先将原胞转换成矩形晶胞, 再沿两个晶向施加应变. 本工作中应变变量  $\mu$  表示为

$$\mu = \frac{a - a_0}{a_0} \times 100\%, \quad (3)$$

其中,  $a$  和  $a_0$  分别代表有无应变时的晶格常数, 应变变量  $\mu$  按指定方向在  $-10\%$ — $10\%$  之间, 间隔为 2%, 负值表示压缩应变, 正值表示拉伸应变.

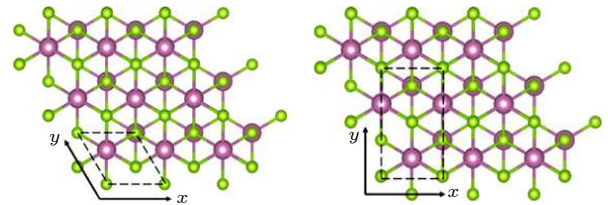


图 5 双轴应变(左)和单轴应变(右)的晶胞选取以及应变施加方向.

Fig. 5. Unit cell selection and strain application direction of biaxial strain (left) and uniaxial strain (right).

图 6 给出了双轴应变下  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 和  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 的带隙变化. 如图 6(a) 所示, 对于  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 异质结双轴拉伸会减小异质结的带隙, 当拉伸应变大于 6% 时, 异质结带隙减小为 0, 即发生半导体-金属转变. 压缩应变对异质结能带的影响则较为复杂, 较小的单轴应变会使异质结的带隙增大, 但当压缩应变大于 6% 时异质结的带

隙会减小,同时还从间接带隙变为直接带隙.不同应变下带隙的大小和类型见表1.综合比较  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 和  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 在不同应变下的带隙大小,可发现在施加相同大小拉伸应变时,  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 的带隙均小于  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 的带隙;施加相同大小压缩应变时,  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 的带隙均大于  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 的带隙,这说明  $\text{In}_2\text{Se}_3$  的极化方向反转对处于拉伸和压缩应变下的异质结能带的影响相反.

图7给出了  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 和  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 异质结能带随应变的变化规律.图中标出了不同部分对能带的贡献.计算结果表明,施加-8%双轴压缩应变时,  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 的CBM和VBM所在

能带均主要由  $\text{In}_2\text{Se}_3$  贡献.图8为施加-4%和-8%双轴压缩应变时  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 的CBM和VBM所在能带的空间电荷分布.可看出,在-8%双轴压缩应变下,CBM和VBM所在能带均主要分布于  $\text{In}_2\text{Se}_3$ .以上计算结果表明施加压缩应变还会使  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 的能带匹配类型由II型变为I型.

图9为  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 和  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 在单轴应变下的带隙变化.异质结在单轴应变下的带隙变化趋势与双轴应变类似:拉伸应变会减小带隙,较小的压缩应变会使带隙增大,但较大的压缩应变则会使带隙减小,同时也会使带隙类型由间接带隙变为直接带隙.图10为两种结构在单轴应变下的能带结构,可看出在等量的拉伸应变下双轴应

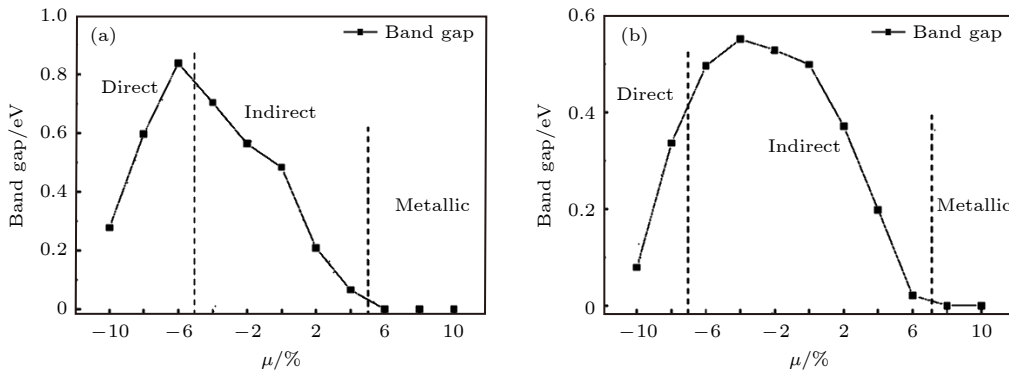


图6 (a)不同双轴应变下  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 的带隙; (b)不同双轴应变下  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 的带隙  
Fig. 6. (a) Band gap of  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) under biaxial strain; (b) band gap of  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) under biaxial strain.

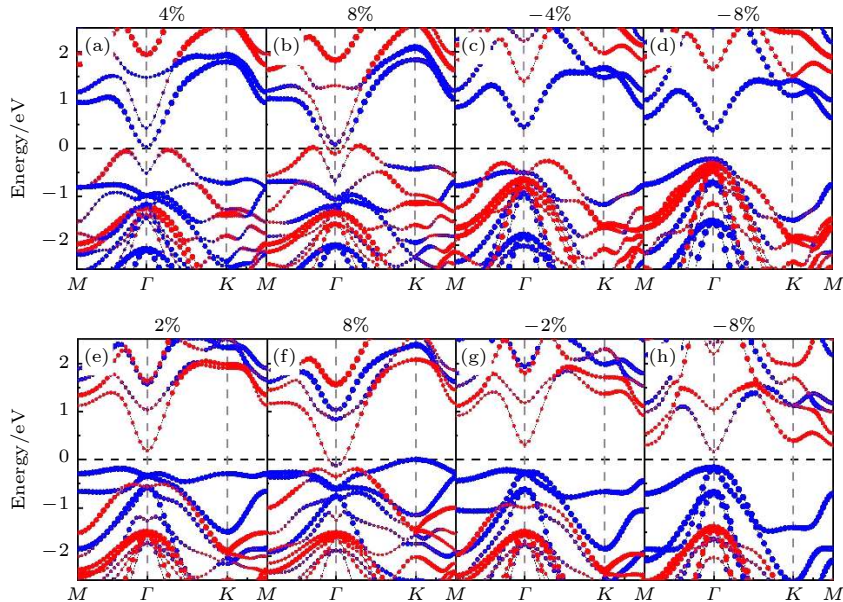


图7 (a)—(d)4%、8%、-4%和-8%双轴应变下  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 的投影能带结构; (e)—(h) 2%、8%、-2%和-8%双轴应变下  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 的投影能带结构.能带图中红色部分表示 InSe 对能带的贡献,蓝色部分表示  $\text{In}_2\text{Se}_3$  对能带的贡献  
Fig. 7. (a)—(d) The projected band structure of  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) under 4%, 8%, -4% and -8% biaxial strain; (e)—(h) Projected band structure of  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) under 2%, 8%, -2% and -8% biaxial strain. The red part of the energy band indicates the contribution of InSe, the blue part indicates the contribution of  $\text{In}_2\text{Se}_3$ .

表 1 双轴应变下  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 及  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 的带隙.

Table 1. Band gap of  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) and  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$ (II) under biaxial strain.

$\mu/\%$	$\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$ (I)		$\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$ (II)	
	Gap/eV	Character	Gap/eV	Character
-10	0.28	direct	0.08	direct
-8	0.60	direct	0.34	direct
-6	0.84	direct	0.50	indirect
-4	0.70	indirect	0.55	indirect
-2	0.56	indirect	0.53	indirect
0	0.50	indirect	0.46	indirect
2	0.21	indirect	0.37	indirect
4	0.07	indirect	0.20	indirect
6	—	metallic	0.02	indirect
8	—	metallic	—	metallic
10	—	metallic	—	metallic

变对带隙的影响较单轴应变更大,  $x$  方向和  $y$  方向应变对带隙的影响近似. 在较小的等量压缩应变下双轴应变使带隙增加的更多, 但较小的单轴压缩应变便可使带隙由间接带隙变为直接带隙, 这可由图 7 与图 10 的对比中看出.

值得注意的是, 通常应力会改变铁电材料的极化矢量的取向及大小, 也即挠曲效应<sup>[26,27]</sup>. 本文虽然没有直接计算不同应力下单层  $\text{In}_2\text{Se}_3$  极化矢量的变化, 但应力对极化矢量的影响在自洽计算中自然包含在内, 故本文不对极化矢量做具体的计算, 而是主要聚焦于能带在应力下的演化规律.

### 4 结 论

本文基于第一性原理计算研究了二维  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  铁电异质结的能带结构, 探讨了双轴应变和单轴

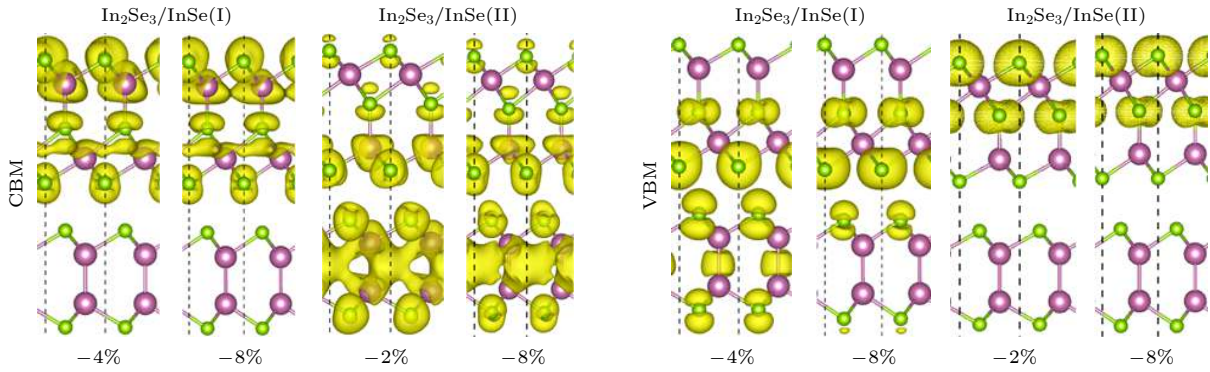


图 8 -4% 和 -8% 双轴应变下  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$ (I) CBM 和 VBM 所在能带的电荷空间分布以及 -2% 及 -8% 双轴应变下  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) CBM 和 VBM 所在能带的电荷空间分布

Fig. 8. Decomposed charge densities of CBM and VBM for  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) under -4% and -8% biaxial strain and the decomposed charge densities of CBM and VBM for  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) under -2% and -8% biaxial strain.

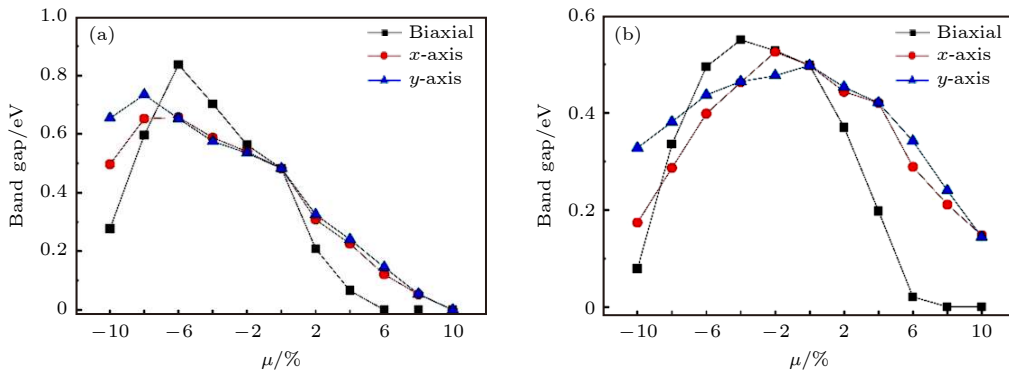


图 9 (a)  $x$  方向与  $y$  方向单轴应变和双轴应变下  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 的带隙; (b)  $x$  方向与  $y$  方向单轴应变和双轴应变下  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 的带隙

Fig. 9. (a) Band gap of  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) under  $x$ -axis strain,  $y$ -axis strain and biaxial strain; (b) band gap of  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) under  $x$ -axis strain,  $y$ -axis strain and biaxial strain.

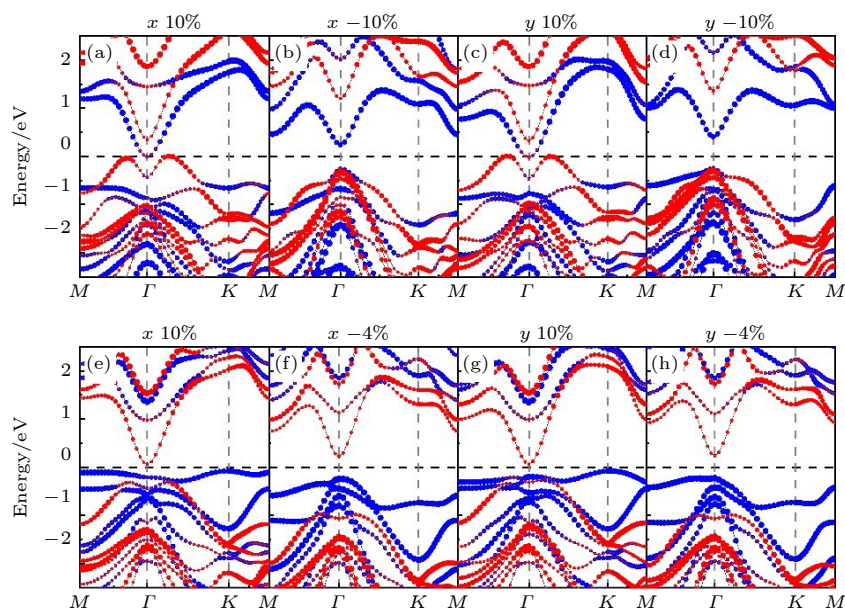


图 10 (a)—(d)  $x$  和  $y$  方向 10%、-10% 应变下  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 的投影能带结构; (e)—(h)  $x$  和  $y$  方向 10%、-4% 应变下  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 的投影能带结构. 能带图中红色部分表示  $\text{InSe}$  对能带的贡献, 蓝色部分表示  $\text{In}_2\text{Se}_3$  对能带的贡献

Fig. 10. (a)–(d) Projected band structure of  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) under 10%, -10%  $x$ -axis strain and 10%, -10%  $y$ -axis strain; (e)–(h) projected band structure of  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) under 10%, -4%  $x$ -axis strain and 10%, -4%  $y$ -axis strain. The red part of the energy band indicates the contribution of  $\text{InSe}$ , the blue part indicates the contribution of  $\text{In}_2\text{Se}_3$ .

应变对异质结能带结构的调控规律. 二维  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 异质结具有间接带隙, 大小为 0.5 eV;  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (II) 也是间接带隙, 大小为 0.46 eV. 两种异质结都是 II 型能带匹配, 对于  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  (I) 结构, 其 VBM 和 CBM 分别来自于  $\text{InSe}$  和  $\text{In}_2\text{Se}_3$ ; 极化方向反转会使它们的 CBM 和 VBM 的空间分布对调. 拉伸应变可减小异质结的带隙, 在一定拉伸度下可转变为金属, 压缩应变则可使异质结从间接带隙变为直接带隙. 相比而言, 双轴应变对带隙的调控较单轴应变更有效. 本论文研究结果表明机械应变可有效调控二维  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  铁电异质结的能带结构, 可为设计相关光电器件提供理论参考.

## 参考文献

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [2] Lu W, Nan H, Hong J, Chen Y, Zhu C, Liang Z, Ma X, Ni Z, Jin C, Zhang Z 2014 *Nano Res.* **7** 853
- [3] Lalmi B, Oughaddou H, Enriquez H, Kara A, Vizzini S, Ealet B, Aufray B 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 183
- [4] Guo J, Chen X, Jin S, Zhang M, Liang C 2015 *Catal. Today* **246** 165
- [5] Haigh S J, Gholinia A, Jalil R, Romani S, Britnell L, Elias D C, Novoselov K S, Ponomarenko L A, Geim A K, Gorbachev R 2012 *Nat. Mater.* **11** 764

- [6] Bertolazzi S, Krasnozhan D, Kis A 2013 *ACS Nano* **7** 3246
- [7] Tongay S, Fan W, Kang J, Park J, Koldemir U, Suh J, Narang D S, Liu K, Ji J, Li J, Sinclair R, Wu J 2014 *Nano Lett.* **14** 3185
- [8] Shim G W, Yoo K, Seo S B, Shin J, Jung D Y, Kang I S, Ahn C W, Cho B J, Choi S Y 2014 *Acs Nano* **8** 6655
- [9] Zhao Z, Xu K, Ryu H, Zhu W 2020 *ACS Appl. Mater. Interf.* **12** 51820
- [10] Ayadi T, Debbichi L, Badawi M, Said M, Kim H, Rocca D, Lebègue S 2019 *Physica E: Low-dimens. Syst. Nanostruct.* **114** 113582
- [11] Li Y, Chen C, Li W, Mao X, Liu H, Xiang J, Nie A, Liu Z, Zhu W, Zeng H 2020 *Adv. Electron. Mater.* **6** 2000061
- [12] Zheng Z, Yao J, Yang G 2017 *ACS Appl. Mater. Interf.* **9** 7288
- [13] Ayadi T, Debbichi L, Badawi M, Said M, Rocca D, Lebègue S 2021 *Appl. Surf. Sci.* **538** 148066
- [14] Zhou B, Jiang K, Shang L, Zhang J, Li Y, Zhu L, Gong S J, Hu Z, Chu J 2020 *J. Mater. Chem. C* **8** 11160
- [15] Dhakal K P, Roy S, Jang H, Chen X, Yun W S, Kim H, Lee J, Kim J, Ahn J H 2017 *Chem. Mater.* **29** 5124
- [16] Desai S B, Seol G, Kang J S, Fang H, Battaglia C, Kapadia R, Ager J W, Guo J, Javey A 2014 *Nano Lett.* **14** 4592
- [17] Guo Y, Li B, Huang Y, Du S, Sun C, Luo H, Liu B, Zhou X, Yang J, Li J, Gu C 2020 *Nano Res.* **13** 2072
- [18] Liu X, Song C, Wu Z, Wang J, Pan J, Li C 2020 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **53** 385002
- [19] Rahimi K 2021 *Mater. Lett.* **282** 128680
- [20] Grimme S, Antony J, Ehrlich S, Krieg H 2010 *J. Chem. Phys.* **132** 154104
- [21] Ding Y M, Shi J J, Xia C, Zhang M, Du J, Huang P, Wu M, Wang H, Cen Y L, Pan S H 2017 *Nanoscale* **9** 14682
- [22] Hu T, Zhou J, Dong J 2017 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19** 21722
- [23] Ding W, Zhu J, Wang Z, Gao Y, Xiao D, Gu Y, Zhang Z,

- Zhu W 2017 *Nat. Commun.* **8** 14956
- [24] Zhou B, Gong SJ, Jiang K, Xu L, Zhu L, Shang L, Li Y, Hu Z, Chu J 2019 *J. Phys.: Condens. Matter.* **32** 055703
- [25] Bultinek P 2007 *Faraday Discuss.* **135** 347
- [26] Catalan G, Lubk A, Vlooswijk A H G, et al. 2011 *Nat. Mater.* **10** 963
- [27] Cao Y, Chen L Q, Kalinin S V 2017 *Appl. Phys. Lett.* **110** 202903

## Strain control of two-dimensional ferroelectric $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$ vertical heterojunction energy band\*

Li Yong-Ning<sup>1)</sup> Xie Yi-Qun<sup>2)</sup> Wang Yin<sup>1)†</sup>

<sup>1)</sup> (Department of Physics, Shanghai University, Shanghai 200444, China)

<sup>2)</sup> (Department of Physics, Shanghai Normal University, Shanghai 200030, China)

( Received 21 June 2021; revised manuscript received 22 July 2021 )

### Abstract

In recent years, two-dimensional ferroelectric heterojunctions have shown potential applications in the fields of high-density storage and optoelectronic devices. The development of novel two-dimensional ferroelectric heterojunctions is an important current research direction. In this work, first-principles calculations are used to study the band structure and stress control of  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  vertical heterojunction composed of two-dimensional ferroelectric material  $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$  and monolayer  $\text{InSe}$ . The calculations show that the  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  heterojunction is an indirect band gap semiconductor with type-II band matching. When the polarization direction of  $\text{In}_2\text{Se}_3$  is perpendicular to the surface facing outward, the band gap is 0.50 eV, and the top and bottom of the valence band originate from  $\text{InSe}$  and  $\text{In}_2\text{Se}_3$  respectively; when the polarization direction of  $\text{In}_2\text{Se}_3$  points inward the plane, the band gap decreases by 0.04 eV, and the sources of the top of the valence band and the bottom of the conduction band are interchanged. Under in-plane stretching, the greater the degree of stretching, the smaller the band gap is. After a certain threshold is exceeded, the heterojunction changes from a semiconductor into a conductor, which can also change the heterojunction with an indirect band gap into that with a direct band gap. The research results of this work show that changing the polarization direction and applying stress is an effective way to control the two-dimensional  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{InSe}$  ferroelectric heterojunction, which can provide a theoretical reference for designing the relevant ferroelectric devices.

**Keywords:** two-dimensional ferroelectric heterojunction, band modulation, mechanical strain, first principles

**PACS:** 77.80.-e, 73.40.Lq, 21.60.De, 71.20.-b

**DOI:** 10.7498/aps.70.20211158

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11774217, 11804216, 51871156).

† Corresponding author. E-mail: [yinwang@shu.edu.cn](mailto:yinwang@shu.edu.cn)